СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
Дубна

Р4-5149

Б.Н. Захарьев, В.Л. Шмонин

ФИКСИРОВАНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ РЕЗУЛЬТАТОВ В МНОГОКАНАЛЬНОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1970

P4-5149

Б.Н. Захарьев, В.Л. Шмонин

ФИКСИРОВАНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ РЕЗУЛЬТАТОВ В МНОГОКАНАЛЬНОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

Приближенный характер современных методов многоканальной теории рассеяния вносит неопределенность в соответствие между исходными данными задачи и результатом теоретических расчётов. Эта неопределенность не может априорно считаться малой, так как громоздкий вычислительный аппарат методов способствует накоплению ошибок. Определение строгих границ возможной погрешности результата значительно повысит его роль как источника физической информации, так как позволит из сравнения с экспериментом получать достоверные сведения о приемлемости выбранных исходных данных (например, формы потенциала).

При решении задач многоканальной теории рассеяния допускаются два типа погрешностей: обрыв бесконечной системы уравнений и погрешности вычислительного процесса. Учет последних не представляет в настоящее время принципиальной трудности/1,2,3/. Влияние же на результат обрыва бесконечной системы является еще слабо изученной областью.

Известны односторонние вариационные оценки для длины рассеяния/4/. Попытки получить такие оценки при ненулевой энергии/5/ вряд ли можно считать полностью успешными.

Ниже предлагается метод приближенного решения уравнения Шредингера, позволяющий произвести полный учёт погрешностей и указать строгие двустронние границы значений любой наблюдаемой величины.

1. Уравнение Шредингера

$$(H-E)\Psi = 0$$

вычитанием из Ψ асимптотики падающей волны Φ приводится к виду

$$Lu \equiv (H-E)u = (H-E)\,\Phi \equiv f\,, \tag{1}$$

где

$$u = \Psi - \Phi\,.$$

Функцию u ищем в виде разложения по n -мерному базису

$$u_n = \sum_{i=1}^{n} \tilde{\tilde{a}}_i \phi_i\,. \tag{2}$$

Точное решение формально может быть записано в виде

$$u = \sum_{i=1}^{n} a_i \phi_i + X\,, \tag{3}$$

где X – остаток разложения точного решения. Сохраним его, чтобы посмотреть, к чему приводит обрыв системы. Подстановка (3) в (1) дает уравнение

$$\sum_{i=1}^{n} a_i L\phi_i + LX = f\,. \tag{4}$$

Переход к системе алгебраических уравнений для коэффициентов a_i осуществляется проецированием уравнения (4) на некоторое n -мерное подпространство из области значений оператора L. В качестве базиса этого подпространства выберем функции χ_j, полученные при ортонормировании функций $L\phi_i$. Ортонормирование производится по известной процедуре Шмидта:

$$\begin{aligned} \chi_1 &= c_1 L\phi_1\,, \\ \chi_2 &= c_2(L\phi_1 + \alpha_2^2 L\phi_2), \\ &\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ \chi_n &= c_n(L\phi_1 + \dots + \alpha_n^n L\phi_n), \\ \chi_{LX} &= c_{LX}(L\phi_1 + \dots + \alpha_{LX}^{LX} LX). \end{aligned} \tag{5}$$

Коэффициенты c_j и α_j^i находятся из условия $(\chi_j, \chi_x) = \delta_{jx}$. Разумеется, функция χ_{LX} неизвестна и не может быть построена. Однако формально будем предполагать, что процедура (5) произведена и для χ_{LX}.

Важным следствием такого выбора функций χ_j является их ортогональность к функциям $L\phi_i$ с $j > i$:

$$(\chi_j, L\phi_i) = 0 \qquad j > i\,. \tag{6}$$

В силу (6) при проектировании уравнения (4) на подпространство функций (5) приходим к системе алгебраических уравнений с правой треугольной(!) матрицей.

$$\begin{pmatrix} (\chi_1, L\phi_1) & (\chi_1, L\phi_2) & \dots & (\chi_1, LX) \\ 0 & (\chi_2, L\phi_2) & \dots & (\chi_2, LX) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & (\chi_{LX}, LX) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ f_{LX} \end{pmatrix} \tag{7}$$

Здесь $f_j = (\chi_j, f)$.

На практике решается оборванная система (без последнего столбца и последней строки) с матрицей $\mathcal{F}$. Если бы матрица системы (7) не была треугольной, то необходим был бы обрыв и матрицы и правой части. Преимущество полученной треугольной матрицы состоит в том, что для перехода к приближенному решению достаточно положить $f_{LX}=0$, т.е. оборвать лишь правую часть. Таким образом, решение приближенной системы соответствует решению точной с известной погрешностью в правой части, норма которой определяется выражением

$$\|\delta f\| = \| f - \sum_j^n \chi_j\,(\chi_j, f)\,\|.$$

Оценка влияния такой погрешности на результат может быть произведена по формуле[1]

$$\frac{\|\delta a\|}{\|a\|} \le \text{Cond}(M) \cdot \frac{\|\delta f\|}{\|f\|}. \qquad (8)$$

Cond(M) – число обусловленности матрицы M системы (7)

$$\text{Cond}(M) = \|M\|\,\|M^{-1}\|. \qquad (9)$$

Задача теперь состоит в получении оценки величины Cond(M). Она осложняется тем, что M содержит неизвестные элементы.

2. Докажем, что матрица M может быть приведена ортогональным преобразованием к виду

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots\dots & (\chi_1, LX) \\ 0 & \lambda_2 & \dots\dots & (\chi_2, LX) \\ \dots & \dots & \dots\dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots\dots & (\chi_{LX}, LX) \end{pmatrix} \qquad (10)$$

где λ_i – сингулярные [3] числа известной матрицы $\mathfrak{F}$.

Прежде всего покажем, что матрица $\mathfrak{F}$ усеченной системы может быть приведена к диагональному виду D одним правым ортогональным преобразованием.

Известно [3], что произвольная матрица A может быть приведена к такому виду двумя ортогональными преобразованиями U и V

$$U^T A V = D.$$

Специальный (5) выбор функций χ_j при проектировании уравнения (4) включает в себя проведение левого преобразования и остается только произвести правое.

Действительно, для получения усеченной системы с матрицей $\mathfrak{F}$ проектируется усеченное уравнение

$$\sum_{i=1}^{n} \tilde{a}_i L\phi_i = f. \qquad (11)$$

Разложим в (11) функции $L\phi_i$ по набору χ_k $(k=1,2\dots n)$ ($L\phi_i$ лежат в подпространстве, образованном функциями χ_k, согласно (5))

$$\sum_{i=1}^{n} a_i \sum_{k=1}^{n} c_{ik}\,\chi_k = f. \qquad (12)$$

В силу (6)

$$c_{ik} = 0 \qquad \text{для} \quad i > k. \qquad (13)$$

Перейдем в уравнении (12) к новой системе параметров b_k

$$\sum_{ik} b_k\, d_{ik}\, \chi_k = f. \qquad (14)$$

Очевидно, при проектировании (14) на базис χ_j получится система с диагональной матрицей. Осталось показать, что матрица преобразования V от a к b может быть построена ортогональной. Эта матрица содержит n^2 параметров. Условие (13) накладывает на них $\frac{n(n-1)}{2}$ связей, а требование ортогональности $\frac{n(n+1)}{2}$ связей, т.е. всего n^2 и значит такая матрица V может быть построена:

$$\mathfrak{F}_a = \mathfrak{F}\, V^{-1}\, V a = D\, b = f.$$

Очевидно, матрица M приводится к виду (10) действием на нее справа ортогональной матрицы

$$\begin{matrix} V & 0 \\ 0 & 1 \end{matrix}\ .$$

3. Оценим теперь норму матрицы M и обратной ей матрицы. Известно, что ортогональные преобразования не меняют нормы матрицы. Поэтому достаточно оценить норму матрицы (10). При ее действии на произвольный единичный вектор c получается выражение

$$
\begin{pmatrix}
\lambda_1 & 0 & \cdots & (\chi_1, LX) \\
0 & \lambda_2 & \cdots & (\chi_2, LX) \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
0 & 0 & \cdots & (\chi_{LX}, LX)
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{LX} \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
\lambda_1 c_1 + (\chi_1, LX)\, c_{LX} \\
\lambda_2 c_2 + (\chi_2, LX)\, c_{LX} \\
\cdots \\
(\chi_{LX}, LX)\, c_{LX}
\end{pmatrix}
\tag{15}
$$

$$
\|M\|^2 = \max_{\|c\|=1} \|Mc\|^2 = \sum_{i=1}^{n} (\lambda_i c_i + (\chi_i, LX)\, c_{LX})^2 + (\chi_{LX}, LX)^2 c_{LX}^2 \leq
$$

$$
\leq 2\left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 c_i^2 + \sum_{i=1}^{n} (\chi_i, LX)^2 c_{LX}^2\right) + (\chi_{LX}, LX)^2 c_{LX}^2 \leq \tag{16}
$$

$$
\leq 2\left(\lambda_{max}^2 + \sum_{i=1}^{n} (\chi_i, LX)^2\right) + (\chi_{LX}, LX)^2 .
$$

Единственной неизвестной величиной в (16) является $\sum_{i=1}^{n}(\chi_i, LX)^2$; так как величина (χ_{LX}, LX) определена из системы (7):

$$
(\chi_{LX}, LX) = f_{LX} = \|\delta f\| \;{}^{*)} .
$$

Аналогичным образом через $\sum_{j=1}^{n}(\chi_j, LX)^2$ можно оценить и норму обратной матрицы

$$
\begin{pmatrix}
\frac{1}{\lambda_1} & 0 & \cdots & 0 \\
0 & \frac{1}{\lambda_2} & \cdots & 0 \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
-\frac{(\chi_1, LX)}{\lambda_1 (\chi_{LX}, LX)} & -\frac{(\chi_2, LX)}{\lambda_2 (\chi_{LX}, LX)} & \cdots & \frac{1}{(\chi_{LX}, LX)}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{LX} \end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\frac{c_1}{\lambda_1} \\
\frac{c_2}{\lambda_2} \\
\vdots \\
\sum_{i=1}^{n} \frac{c_i (\chi_i, LX)}{\lambda_i (\chi_{LX}, LX)} + \frac{c_{LX}}{(\chi_{LX}, LX)}
\end{pmatrix}
$$

---

x/ Здесь мы воспользовались условием полноты.

$$
\|M^{-1}\|^2 = \max_{\|c\|=1} \|M^{-1} c\|^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{a_i^2}{\lambda_i^2} + \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{c_i (\chi_i, LX)}{\lambda_i (\chi_{LX}, LX)} + \frac{c_{LX}}{(\chi_{LX}, LX)}\right)^2 \leq \tag{17}
$$

$$
\leq \frac{1}{\lambda_{min}^2} + \frac{2 \sum_{i=1}^{n} (\chi_i, LX)^2}{\lambda_{min}^2 (\chi_{LX}, LX)^2} + \frac{2}{(\chi_{LX}, LX)^2} .
$$

Тогда оценка числа обусловленности может быть выражена через величину $\sum_{i=1}^{n}(\chi_i, LX)^2$ следующим образом:

$$
(\mathrm{Cond}\, M)^2 \leq (\mathrm{Cond}\, \mathcal{F})^2 \Bigg[\frac{4\left(\sum_{i=1}^{n}(\chi_i, LX)^2\right)^2}{\lambda_{max}^2 (\chi_{LX}, LX)^2} + \tag{18}
$$

$$
+ \sum_{i=1}^{n} (\chi_i, LX)^2 \left(\frac{4}{(\chi_{LX}, LX)^2} + \frac{4}{\lambda_{max}^2} + \frac{4\lambda_{min}^2}{\lambda_{max}^2 (\chi_{LX}, LX)^2} \right) +
$$

$$
+ 2 + \frac{4\lambda_{min}^2}{(\chi_{LX}, LX)^2} + \frac{(\chi_{LX}, LX)^2}{\lambda_{max}^2} + 2\,\frac{\lambda_{min}^2}{\lambda_{max}^2} \Bigg].
$$

4. Для точного решения, очевидно, справедливо

$$
\sum_{i=1}^{n} a_i L \phi_i + P_n LX = P_n f , \tag{19}
$$

где P_n – проектор на подпространство функций $\chi_i (i = 1,2 \ldots n)$. Уравнение (19) эквивалентно системе n уравнений:

$$
\mathcal{F} a + z = f^n , \tag{19'}
$$

где z – вектор с компонентами (χ_i, LX); f^n – вектор с компонентами $f_i = (\chi_i, f)$ $(i = 1,2 \ldots n)$.

При получении приближенного решения вместо (19) используется

$$
\mathcal{F} \tilde{\tilde{a}} = f^n . \tag{20}
$$

Вычитая (19) из (20), приходим к соотношению

$\mathcal{F}\,\delta a = z$.

Отсюда

$$\|\delta a\| > \frac{\|z\|}{\|\mathcal{F}\|} = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(\chi_i, LX)^2}}{\|\mathcal{F}\|} . \tag{21}$$

Из полной системы (7) следует

$$\|\delta a\| \leq \|M^{-1}\|\,\|\delta f\| . \tag{22}$$

Подстановка (21) в (22) дает неравенство

$$\sum_{i=1}^{n}(\chi_i, LX)^2 \leq \|\mathcal{F}\|^2 \left[\frac{1}{\lambda^2_{min}} + \frac{2\sum_{i=1}^{n}(\chi_i, LX)^2}{\lambda^2_{min}(\chi_{LX}, LX)^2} + \right.$$

$$\left. + \frac{2}{(\chi_{LX}, LX)^2} \right] \|\delta f\|^2 . \tag{23}$$

Исследование неравенства (23) позволяет установить верхнюю границу величины $\sum_{i=1}^{n}(\chi_i, LX)^2$ а, следовательно, дать оценку числа обусловленности матрицы M .

5. Перейдем теперь к оценке значений физических величин. Во многих случаях сами коэффициенты a_i имеют физический смысл. Так, в методе усеченных асимптотик/6/, например, в набор функций ϕ_i включаются уходящие асимптотики. Коэффициенты a_i при них - амплитуды соответствующих каналов. В общем случае наблюдаемая R является функционалом от Ψ . Варьируя погрешности коэффициентов a_i , можно определить верхнюю и нижнюю границы величины R .

Авторы благодарны И.В. Амирханову, В.П. Жигунову, Е.П. Жидкову, Г.И. Макаренко, О. Лхагве, В.П. Пермякову, А.И. Титову и Ю.Н. Фенину за полезные дискуссии.

Литература

1. *Д.К. Фадеев, В.Н. Фадеева. Вычислительные методы линейной алгебры. Физматгиз, Москва, 1960.*
2. *В.В. Воеводин. Ошибки округления и устойчивость в прямых методах линейной алгебры. ВЦ МГУ, 1969.*
3. *Дж. Форсайт, К. Моллер. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений, Мир, Москва, 1969.*
4. *Spruch L., Rosenberg L., O'Malley T. Phys.Rev., 119, 164 1960.*
5. *Spruch L., Hahn Y., O'Malley T. Phys.Rev., 134, B397, 1964.*
6. *Т.Г. Ефименко, В.П. Жигунов, Б.Н. Захарьев. Ann. of Phys., 47, 275 (1969).*

Рукопись поступила в издательский отдел

2 июня 1970 года.